

ТЕОРИЯ ОБМЕННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И МАГНЕТОСОПРОТИВЛЕНИЯ В МЕТАЛЛИЧЕСКИХ МАГНИТНЫХ СВЕРХРЕШЕТКАХ

С.Н.Молотков

*Институт физики твердого тела РАН
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 16 декабря 1992 г.

Предлагается единый подход для описания осцилляций обменного взаимодействия между магнитными слоями разделенными немагнитной прослойкой и магнетосопротивления.

Магнитное взаимодействие между двумя ферромагнитными слоями разделенными тонкой (5-30 атомных слоев) немагнитной металлической прослойкой, а также в сверхрешетках из чередующихся магнитных и немагнитных материалов, вызывает в последнее время большой интерес ¹.

В экспериментах по электронной микроскопии с поляризационным анализом ², спин-поляризованной дифракции медленных электронов ³ и других опытах ⁴⁻⁷ было обнаружено, что величина обменного взаимодействия осциллирует (меняет знак) как функция числа слоев в немагнитной прослойке. Причем в зависимости от используемых материалов были обнаружены осцилляции с периодом от нескольких атомных слоев до одного атомного слоя ^{2,5}. Анализ ряда экспериментов ⁸ позволяет заключить о наличии биквадратичного обмена между ферромагнитными слоями.

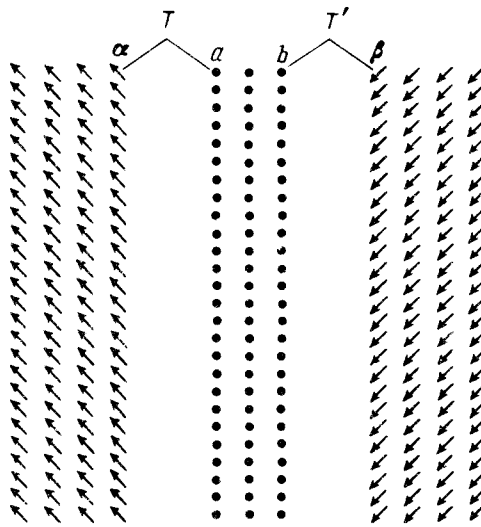
Кроме того, в таких системах во внешнем магнитном поле наблюдается гигантское магнетосопротивление в перпендикулярном слоям направлении ^{1,9}.

Несмотря на ряд теоретических работ ¹⁰⁻¹⁴ полное понимание данного круга явлений отсутствует. В данной работе мы хотим предложить единый подход для описания наблюдаемых эффектов. В этом подходе осцилляции обменного взаимодействия в том числе возникновение биквадратичного обмена и магнетосопротивления могут быть описаны единым образом.

Известно, что РККИ-взаимодействие между ионами переходных металлов в металлической матрице возникает за счет поляризации электронов проводимости ¹⁵. В нашем случае взаимодействие между ферромагнитными слоями возникает за счет поляризации электронов в прослойке. Поляризация в прослойке появляется за счет туннелирования спин-поляризованных электронов из ферромагнитных слоев. Для выяснения наиболее энергетически выгодной взаимной ориентации намагниченностей в ферромагнитных слоях, необходимо знать энергию системы как функцию от числа слоев и ориентации намагниченностей. Удобно это сделать следующим образом. Пусть сначала имеются три не взаимодействующие подсистемы (см. рисунок), когда туннелирование между слоями отсутствует. Для перехода к реальной системе необходимо включить перекрытие между подсистемами (см. рисунок), которое будем описывать гамильтонианом

$$\hat{H}_{int} = \hat{T} \hat{c}_\alpha^+ \hat{c}_a + \hat{c}_a^+ \hat{c}_\alpha \hat{T} + \hat{T}' \hat{c}_\beta^+ \hat{c}_b + \hat{c}_b^+ \hat{c}_\beta \hat{T}' +, \quad (1)$$

где $\hat{c}_i = \{c_{in\mathbf{k}\sigma}\}$, $i = \alpha, \beta, a, b$ (см. рисунок) крайние атомные слои в соответствующих подсистемах, \mathbf{k} - квазиимпульс вдоль слоя, σ - спиновый индекс, n -



индекс, описывающий тип орбитали и ее положение на узлах решетки, \hat{T}, \hat{T}' – матрицы интегралов перекрытия диагональные по спину (туннелирование не меняет ориентацию спина). После приведения подсистем в плотный контакт изменения энергии дается стандартной термодинамической формулой ¹⁶

$$\delta E = \int_0^1 \frac{dg}{g} \langle \hat{H}_{int} \rangle, \quad (2)$$

где введена безразмерная константа туннельного взаимодействия $\hat{T}(g) = g\hat{T}$, $\hat{T}'(g) = g\hat{T}'$ ($g = 0$ отвечает невзаимодействующим подсистемам, $g = 1$ – подсистемам в плотном контакте). Усреднение в (2) проводится по состоянию системы с учетом туннельного взаимодействия. Прямая подстановка (1) в формулу (2) дает

$$\delta E = \int_0^1 \frac{dg}{g} \int \frac{d\epsilon dk}{(2\pi)^3} \text{Sp}\{\hat{T}\hat{G}_{\alpha\alpha}^+(\epsilon k, g) + \hat{G}_{\alpha\alpha}^+(\epsilon k, g)\hat{T}^+ + \hat{T}'\hat{G}_{\beta\beta}^+(\epsilon k, g) + \hat{G}_{\beta\beta}^+(\epsilon k, g)\hat{T}'^+\}, \quad (3)$$

Sp проводится по индексам орбиталей и спиновым индексам, G^+ – келдышевская функция Грина (ФГ) ¹⁷,

$$\hat{G}^+(\epsilon k, g) = i \langle \hat{c}_\alpha^+ \hat{c}_\alpha \rangle, \quad (4)$$

ФГ в формуле (3) могут быть выражены через ФГ невзаимодействующих подсистем, которые содержат всю информацию об электронной плотности, локальной намагниченности и так далее, которые мы считаем известными. Выражение для ФГ может быть представлено в виде

$$\hat{G}^\pm = \frac{\hat{I}}{\hat{I} - g\hat{g}^R\hat{T}} \hat{g}^\pm \frac{\hat{I}}{\hat{I} - g\hat{T}^+\hat{g}^A},$$

$$\hat{g} = \begin{pmatrix} \hat{g}_{11} & \hat{g}_{12} \\ \hat{g}_{21} & \hat{g}_{22} \end{pmatrix}, \quad \hat{g}_{11} = \begin{pmatrix} \hat{g}_{\alpha\alpha} & 0 \\ 0 & \hat{g}_{aa} \end{pmatrix}, \quad \hat{g}_{12} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \hat{g}_{ab} & 0 \end{pmatrix},$$

$$\hat{g}_{21} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{g}_{ba} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{g}_{22} = \begin{pmatrix} \hat{g}_{bb} & 0 \\ 0 & \hat{g}_{\beta\beta} \end{pmatrix}$$

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} \hat{T} & 0 \\ 0 & \hat{T} \end{pmatrix}, \quad \hat{T} = \begin{pmatrix} 0 & \hat{T} \\ \hat{T}^+ & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{T}' = \begin{pmatrix} 0 & \hat{T}' \\ \hat{T}'^+ & 0 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Индексы R, A обозначают запаздывающую и опережающую ФГ, индексы \pm - кельдышевские ФГ. Окончательно для энергии имеем

$$\delta E = \int_0^1 dg \int \frac{d\epsilon dk}{(2\pi)^3} \text{Sp}\{\hat{T}\hat{G}^+ + \hat{G}^+\hat{T}^+\}. \quad (6)$$

Таким образом, ответ выражается через ФГ для невзаимодействующих слоев. Данный способ дает точное (в любом порядке по T, T') изменение энергии системы.

Для спин-поляризованной системы ФГ могут быть представлены в виде

$$\hat{g}_{\alpha\alpha,\beta\beta}^{R,A} = \hat{g}_{\alpha\alpha,\beta\beta}^{NR,A} + (\vec{\sigma}m_{\alpha,\beta})\hat{g}_{\alpha\alpha,\beta\beta}^{SR,A}$$

$$\hat{g}_{\alpha\alpha,\beta\beta}^{\pm R,A} = 2\pi i \hat{\rho}_{\alpha\alpha,\beta\beta}^N + (\vec{\sigma}m_{\alpha,\beta})\hat{\rho}_{\alpha\alpha,\beta\beta}^S \begin{cases} f(\epsilon) \\ f(\epsilon) - 1 \end{cases}, \quad (7)$$

$$\hat{\rho}_{\alpha\alpha,\beta\beta}^{N,S} = -\frac{1}{\pi} \{\hat{g}_{\alpha\alpha,\beta\beta}^{N,SR}\},$$

где m_α, m_β - единичные векторы вдоль намагниченностей в слоях α, β , $\hat{\rho}^N, \hat{\rho}^S$ - спин-независящая и спин-зависящая части плотности состояний, $f(\epsilon)$ - фермиевская функция распределения, и намагниченность

$$M_{\alpha,\beta} = \int \frac{d\epsilon dk}{(2\pi)^3} \text{Sp}\{\vec{\sigma}\hat{g}_{\alpha\alpha,\beta\beta}^+\} = m_{\alpha\beta} \int \frac{d\epsilon dk}{(2\pi)^3} \text{Sp}\{\hat{\rho}_{\alpha\alpha,\beta\beta}^S\} f(\epsilon)$$

и плотность заряда

$$\rho_{\alpha,\beta} = \int \frac{d\epsilon dk}{(2\pi)^3} \text{Sp}\{\hat{g}_{\alpha\alpha,\beta\beta}^+\} = \int \frac{d\epsilon dk}{(2\pi)^3} \text{Sp}\{\hat{\rho}_{\alpha\alpha,\beta\beta}^N\} f(\epsilon). \quad (8)$$

Как следует из формул (5)-(7) δE является сложной функцией намагниченностей в ферромагнитных слоях, разложение знаменателя в формуле (5) для \hat{G}^\pm приводит к степенному ряду с различными степенями намагниченностей в δE .

$$\delta E = (\text{const} + m_\alpha^2 + m_\beta^2 + J(m_\alpha m_\beta) + (m_\alpha m_\beta)^2 + \dots) \quad (9)$$

последний член описывает биквадратичный обмен. В данном подходе он возникает более естественным образом, чем в работе ⁸. Все константы в (9) могут быть выражены через микроскопические характеристики слоев. Для константы обменного взаимодействия $J(N)$ находим

$$J(N) = \frac{1}{4} \int \frac{d\epsilon dk}{(2\pi)^3} f(\epsilon) \text{Sp}\{\hat{T}\hat{\rho}_{\alpha\alpha}^S \hat{T}^+ \text{Re}\{\hat{g}_{ab}^R \hat{T}'^+ \hat{g}_{\beta\beta}^{SR} \hat{T}'^+ + \hat{g}_{ba}^R\} +$$

$$+ \hat{T}'^+ \hat{\rho}_{\beta\beta}^S \hat{T}'^+ + \hat{g}_{ba}^R \hat{T} \text{Re}\{\hat{g}_{\alpha\alpha}^{SR}\} \hat{T}^+ + \hat{g}_{ab}^A + \hat{T} \hat{\rho}_{ab} \hat{T}'^+ \hat{g}_{\beta\beta}^{SA} \hat{T}'^+ + \hat{g}_{ab}^A \hat{T}^+ \text{Re}\{\hat{g}_{\alpha\alpha}^{SR}\} +$$

$$+\hat{T}'\rho_{ab}\hat{T}\text{Re}\{\hat{g}_{\alpha\alpha}^{SR}\}\hat{T}^+\hat{g}_{ab}^R\hat{T}'^+\hat{g}_{\beta\beta}^{SR} + \left. \begin{array}{l} \text{(замена } a \rightarrow b, \alpha \rightarrow \beta, T \rightarrow T') \\ b \rightarrow a, \beta \rightarrow \alpha, T' \rightarrow T \end{array} \right\}. \quad (10)$$

Информация о числе слоев и электронной структуре прослойки заключена в ФГ \hat{g}_{ab} , которая описывает распространение электрона от одного конца прослойки до другого. Выражение для \hat{g}_{ab} может быть найдено (как и других) из зонных расчетов. Для того, чтобы продемонстрировать осциллирующее поведение $J(N)$ вычислим \hat{g}_{ab} для конечной одномерной прослойки (цепочки в методе сильной связи с интегралом перекрытия $t/2$) длины N . Осциллирующая часть $J(N)$ пропорциональна

$$J(N) \propto \int_0^{\epsilon_F} \text{Im}\{[(\epsilon + i(t^2 - \epsilon^2)^{1/2})/t]^N\} d\epsilon \propto t \sin(N\epsilon_F/t)/N, \quad (11)$$

ϵ_F — энергия Ферми в прослойке. Подчеркнем, что формула служит для иллюстрации. Важно отметить, что период осцилляций определяется деталями электронной структуры, и даже в простейшем примере зависит от ширины зоны (t), и энергии Ферми, и может меняться в широких пределах. Убывание $1/N$ также отражение свойств конкретной одномерной модели.

Подчеркнем, что реальным параметром разложения являются не сами перекрытия T, T' (которые отнюдь не малы), а T/N (или T/N^2 в трехмерном случае). Поэтому поправка к энергии мала и того же порядка T/N^2 (на единицу поверхности), сама же энергия слоев $\sim T$, то есть порядка объемной ширины зоны.

Перейдем к вычислению проводимости системы. Эксперименты по магнетосопротивлению в перпендикулярном слоем направлении демонстрируют явный пороговый характер по величине внешнего магнитного поля⁹. До некоторой величины поля сопротивление практически неизменно, затем скачком при некотором поле меняется и остается далее постоянным с ростом поля. Такое поведение связано с изменением ориентации намагниченностей в ферромагнитных слоях во внешнем поле. Нашей задачей будет нахождение величины скачка проводимости через микроскопические характеристики электронного спектра системы. Для этого необходимо определить составляющую тока, которая зависит от взаимной ориентации намагниченностей. Выражение для тока в методе туннельного гамильтониана¹⁸ может быть представлено в виде (в любом порядке по перекрытию)

$$I = ie \int \frac{d\epsilon d\mathbf{k}}{(2\pi)^3} \text{Sp}\{\hat{T}\hat{G}^+ - \hat{G}^+\hat{T}^+\}. \quad (12)$$

В этом случае при вычислении \hat{G}^\pm должны быть использованы ФГ (5) с учетом внешнего приложенного напряжения. Спин-зависимый вклад в туннельный ток (после разложения знаменателя до второго порядка по перекрытию) может быть представлен как

$$I_s = I_1(m_\alpha m_\beta) \quad (13)$$

$$I_1 = 2e \int \frac{d\epsilon d\mathbf{k}}{2\pi} \text{Sp}\{\hat{T}\hat{\rho}_{\alpha\alpha}^S\hat{T}^+\hat{g}_{ab}^R\hat{T}'\hat{\rho}_{\beta\beta}^S\hat{T}'^+\hat{g}_{ba}^A[f_\alpha - f_\beta] + \\ + \hat{T}\hat{\rho}_{\alpha\alpha}^S\hat{T}^+(\hat{\rho}_{ab}\hat{T}'\hat{g}_{\beta\beta}^SA\hat{T}'^+\hat{g}_{ba}^A + \hat{g}_{ab}^R\hat{T}'\hat{g}_{\beta\beta}^SR\hat{T}'^+\hat{\rho}_{ba}^A)[f_\alpha - f_{\beta}] + \\ + \hat{T}'\hat{\rho}_{\beta\beta}^S\hat{T}'^+(\hat{\rho}_{ba}\hat{T}\hat{g}_{\alpha\alpha}^SA\hat{T}^+\hat{g}_{ab}^A + \hat{g}_{ba}^R\hat{T}\hat{g}_{\alpha\alpha}^SR\hat{T}^+\hat{\rho}_{ab}^A)[f_\beta - f_{ab}]\},$$

здесь f_α , f_β и f_{ab} - функции распределения в левом, правом слоях и прослойке, соответственно. Величина I_1 определяет амплитуду изменения тока при изменении внешним магнитным полем ориентации намагниченностей m_α и m_β .

Таким образом, предлагаемый подход позволяет единым способом описывать обменное взаимодействие между магнитными слоями и магнетосопротивление. Данная схема легко обобщается на случай присутствия спин-орбитального взаимодействия, и следовательно, учета магнитной анизотропии, а также удобна при реалистических компьютерных вычислениях.

Выражаю благодарность С.С.Назину за полезные обсуждения.

-
1. B.Dieny, V.S.Speriosu, S.Metin, et al., J. Appl. Phys. **69**, 4774 (1991).
 2. J.Unguris, R.J.Cellota, and D.T.Pierce, Phys. Rev. Lett. **67**, 140 (1991).
 3. C.Carbone and S.F.Alvarado, Phys. Rev. B **36**, 2433 (1987).
 4. S.T.Purcell, W.Folkerts, M.T.Johnson, et al., Phys. Rev. Lett. **67**, 903 (1991).
 5. S.S.Parkin, R.Bhadra, and K.P.Roche, Phys. Rev. Lett. **66**, 2152 (1991).
 6. T.G.Walker, A.W.Pang, and H.Hopster, Phys. Rev. Lett. **69**, 1121 (1992).
 7. J.Unguris, R.J.Cellota, and D.T.Pierce, Phys. Rev. Lett. **69**, 1125 (1992).
 8. J.C.Slonczewski, Phys. Rev. Lett. **67**, 3172 (1991).
 9. S.S.Parkin, N.More, and K.P.Roche, Phys. Rev. Lett. **64**, 2304 (1990).
 10. H.Hasegawa, Phys. Rev. B **42**, 2368 (1990).
 11. Y.Wang, P.M.Levy, and J.L.Fry, Phys. Rev. Lett. **65**, 2732 (1990).
 12. P.Bruno and C.Chappert, Phys. Rev. Lett. **67**, 1602 (1991).
 13. C.Chappert and J.P.Renard, Europhys. Lett. **15**, 553 (1991).
 14. D.M.Edwards, J.Mathon, R.B.Muniz, and M.S.Phan, J. Cond. Matt. **3**, 4941 (1991).
 15. C.Kittel, Quantum theory of solids, New York: Wiley, 1987.
 16. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Статистическая физики, т.5. М.: Наука 1974.
 17. Л.В.Келдыш, ЖЭТФ **47**, 1515 (1964).
 18. C.Caroli, R.Combescot, P.Nozieres, and D.Saint-James, J.Phys. (Sol. St. Phys.) C **4**, 916 (1971)